

## **ВЛИЯНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ НА КИНЕТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ПЕРВИЧНОГО АКТА ГАЗОФАЗНОГО МОНОМОЛЕКУЛЯРНОГО РАСПАДА НИТРОАРЕНОВ**

© Храповский Григорий Михайлович,\* Чачков Денис Владимирович,<sup>+</sup>  
Николаева Екатерина Валерьевна, Гайсин Ильгиз Самигуллович  
и Шамов Александр Георгиевич

Центр новых информационных технологий. Казанский государственный технологический университет.  
Ул. К. Маркса, 68. г. Казань 420015. Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 231-42-20. E-mail: chachkov@kstu.ru

\*Ведущий направление; <sup>+</sup>Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** нитробензол, монофункциональные производные нитробензола, газофазный распад, квантово-химический расчет, механизмы реакций.

### **Резюме**

С использованием гибридного DFT-метода B3LYP/6-31G(d) определены геометрические параметры нитробензола и ряда его монофункциональных производных. Рассчитаны энергии диссоциации связи C-NO<sub>2</sub>, энергии активации газофазного радикального распада, а также барьеры нитро-нитритной перегруппировки. Полученные результаты использованы для обсуждения конкуренции различных механизмов мономолекулярного распада нитробензолов.